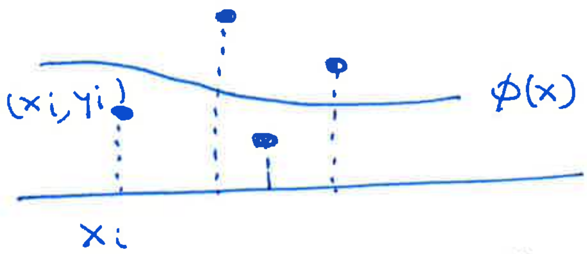
MEJOR APROXIMACIÓN: AJUSTE DE DATOS

Problema: Dado un conjunto discreto de datos $\{(x_i, y_i)\}$ se trata de encontrar ~~un~~ la función $\phi(x)$ de una determinada clase que mejor ajuste/aproxime esos datos.



Cuando decimos que mejor ajuste o aprox. los datos queremos decir que $\phi(x)$ debe minimizar el error

$$E = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (\phi(x_i) - y_i)^2$$

y de aquí el nombre de ajuste por mínimos cuadrados.

Ejemplo: Dados (x_i, y_i); $i = 1, \dots, n$. Calcular la recta $\phi(x) = ax + b$ que mejor ajusta estos datos en el sentido de los mínimos cuadrados.

Se trata de minimizar la expresión

$$E = \sum_{i=1}^{n} (a x_i + b - y_i)^2$$

Para hallar el mínimo de E derivamos respecto de los parámetros a y b e igualamos a cero

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a} &= 2 \sum_{i=1}^{n} (a x_i + b - y_i) x_i = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial b} &= 2 \sum_{i=1}^{n} (a x_i + b - y_i) = 0 \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{array}{l} a \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \\ a \sum_{i=1}^{n} x_i + b \cdot n = \sum_{i=1}^{n} y_i \end{array}\right|$$ Sistema lineal de 2 ecuaciones y 2 incógnitas a y b

El sistema anterior se puede poner como

$$\begin{pmatrix} x_1^2+\cdots+x_n^2 & x_1+\cdots+x_n \\ x_1+\cdots+x_n & 1+\cdots+1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1y_1+\cdots+x_ny_n \\ y_1+y_2+\cdots+y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Ahora planteamos el problema como hacíamos en interpolación: "forzando" a que $\phi(x)=ax+b$ en x_i tome los valores y_i

$$a x_i + b = y_i \; ; \; i=1,\dots,n$$

Obtenemos el sistema

$$\left.\begin{array}{l} a x_1 + b = y_1 \\ \vdots \\ a x_n + b = y_n \end{array}\right\} \qquad \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

El sistema anterior tiene n ecuaciones y 2 incógnitas y, se le denomina "sobredeterminado" (más ec. que incóg.) y es imposible su resolución porque con 2 parámetros a y b no se pueden satisfacer n condiciones (datos)

El sistema sobredeterminado anterior se puede resolver en el sentido de mínimos cuadrados multiplicando por la traspuesta de la matriz del sistema

Si llamamos

$$H = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \qquad c = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \qquad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$H \cdot c = y$ se resuelve ~~multi~~ en el sentido de

mínimos cuadrados, ~~como~~ multiplicando por H^T

$$H^T H c = H^T y \qquad \text{Ecuaciones normales}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 & \cdots & x_n \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & \cdots & x_n \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

que coincide con el sistema de 2 ecuaciones con 2 incógnitas a y b, obtenido a partir de $\frac{\partial E}{\partial a} = 0$ y $\frac{\partial E}{\partial b} = 0$

cuando expresamos la recta $\phi(x) = ax + b$ estamos usando la base de los polinomios $B = \{x, 1\}$

La matriz H del sistema sobredeterminado

$$H = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix}$$

x de B particularizados en x_i $1 \in B$

El estudio anterior de ajuste de datos por una recta en el sentido de mínimos cuadrados se puede generalizar cuando $\phi(x)$ es otro tipo de función

Ejemplo: Ajustar la tabla

x_i	-1	0	1	2
y_i	-2	-1	0	3

por una función $\phi(x) = a + bx + cx^2$ en el sentido de mínimos cuadrados.

Ahora la base es $B = \{1, x, x^2\}$

Sistema sobredeterminado

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & (-1)^2 \\ 1 & 0 & 0^2 \\ 1 & 1 & 1^2 \\ 1 & 2 & 2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$1]_{x_i}$ $x]_{x_i}$ $x^2]_{x_i}$ y_i

Ecuaciones normales

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 6 \\ 2 & 6 & 8 \\ 6 & 8 & 18 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 8 \\ 10 \end{pmatrix}$$

La solución de este sistema nos permite conocer los valores de a, b y c, y por tanto, la función $\phi(x)$ particular que mejor ajusta la tabla en el sentido de los mínimos cuadrados

A veces el problema de ajuste se tiene que modificar un poco para poder resolverlo

Ejemplo: Ajustar una tabla de datos (x_i, y_i); $i=1,\dots,n$ por una curva $\phi(x) = A e^{\beta x}$

Tomando logaritmos

$$\ln \phi(x) = \ln A + \beta x$$

y el sistema sobredeterminado está dado por

$$\ln y_i = \ln A + \beta x_i \quad ; \; i = 1, \dots, n$$

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ln A \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ln y_1 \\ \vdots \\ \ln y_n \end{pmatrix}$$

que es semejante al caso $y_i = a x_i + b$ de ajustar por una recta

En estos casos se está minimizando el error del problema transformado:

$$E = \sum_{i=1}^{n} (\ln A - \beta x_i - \ln y_i)^2$$

Ajuste de datos con restricciones previas

Se trata de calcular una función $\phi(x)$ que cumpla unas condiciones ~~exactas~~ de forma exacta y otras condiciones de forma aproximada (que deben cumplirse en el sentido de "pasar cerca" de unos datos).

En este caso se imponen primero a $\phi(x)$ las condiciones exactas y a continuación, las aproximadas (ajustar datos)

Ejemplo : Calcular $p(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$ para que ajuste la tabla

x_i	-1	1	2	3	4
y_i	4	2	1	1	2

y cuyo valor en $x=0$ debe ser 3 y el valor de su segunda derivada en $x=0$ debe ser 1

$$p(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 \; ; \quad p''(x) = 2c + 6dx$$

Imponemos restricciones

$$\left.\begin{array}{l} p(0) = 3 = a \\ p''(0) = 1 = 2c \end{array}\right\} \quad \begin{array}{l} a = 3 \\ c = \frac{1}{2} \end{array}$$

$$p(x) = 3 + bx + \frac{1}{2}x^2 + dx^3 \Rightarrow p(x) - \frac{1}{2}x^2 - 3 = bx + dx^3$$

Sistema sobredeterminado

$$y_i - \frac{1}{2}x_i^2 - 3 = bx_i + dx_i^3 \qquad i = 1, \dots, 5$$

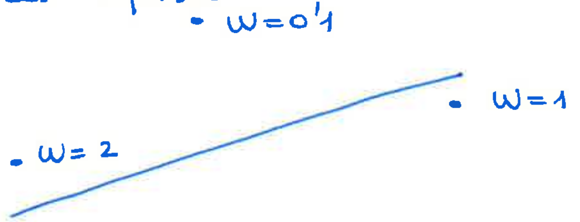
$$\begin{array}{c} \begin{pmatrix} -1 & (-1)^3 \\ 1 & 1^3 \\ 2 & 2^3 \\ 3 & 3^3 \\ 4 & 4^3 \end{pmatrix} \\ \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ x|_{x_i} & x^3|_{x_i} \end{array} \end{array} \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 - \frac{1}{2}(-1)^2 - 3 \\ 2 - \frac{1}{2}\cdot 1^2 - 3 \\ 1 - 1/2 \cdot 2^2 - 3 \\ 1 - 1/2 \cdot 3^2 - 3 \\ 2 - 1/2\, 4^2 - 3 \end{pmatrix}$$

Ajuste de datos con pesos

Se pueden asignar distintos pesos $w_i \geq 0$ a cada uno de los datos a ajustar, minimizando en este caso la expresión

$$E = \sum_{i=1}^{n} w_i \left(\phi(x_i) - y_i \right)^2$$

Un dato con un peso pequeño tiene menor importancia en el ajuste



Ahora la solución del problema se encuentra resolviendo las ecuaciones normales:

$$H^T W H c = H^T W y$$

con

$$W = \begin{pmatrix} w_1 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 \cdots & 0 \\ \vdots & & \\ 0 & \cdots & w_n \end{pmatrix}$$ matriz diagonal con los pesos w_i

Lo comprobamos en el caso de que $\phi(x)$ sea una recta

$$E = \sum_{i=1}^{n} w_i \left(a x_i + b - y_i \right)^2$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a} = 0 &= \sum_{i=1}^{n} 2 w_i (a x_i + b - y_i) x_i \\ \frac{\partial E}{\partial b} = 0 &= \sum_{i=1}^{n} 2 w_i (a x_i + b - y_i) \end{aligned}\right\}$$ Sistema lineal de 2 ecuaciones con 2 incógnitas

$$\left.\begin{aligned} a \sum_{i=1}^{n} w_i x_i^2 + b \sum_{i=1}^{n} w_i x_i &= \sum_{i=1}^{n} w_i y_i x_i \\ a \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + b \sum_{i=1}^{n} w_i &= \sum_{i=1}^{n} w_i y_i \end{aligned}\right\}$$

En forma matricial:

$$\begin{pmatrix} w_1 x_1^2 + \cdots + w_n x_n^2 & w_1 x_1 + \cdots + w_n x_n \\ w_1 x_1 + \cdots + w_n x_n & w_1 + \cdots + w_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 y_1 x_1 + \cdots + w_n y_n x_n \\ w_1 y_1 + \cdots + w_n y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 & \cdots & x_n \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & \cdots & x_n \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & w_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$